Véletlen folyamatok házi feladatai. **11. hét.** **Beadási határidő: máj. 9., 10:00.**

(1) 80pt

Végezzünk szimulációkat egy T hőmérsékletű hőtartállyal kapcsolatban levő, az x-tengely mentén $U(x)$ potenciálban túlcsillapított mozgást végző részecskére. A részecske energiáját az x koordinátán keresztül a következőképpen fejezhetjük ki

$$U(x) = \frac{1}{2}ax^2 + \frac{1}{4}bx^4 + qx\,, \tag{1}$$

ahol a tekinthető a részecskét az origóhoz kötő rugó rugóállandójának, a b paraméter a rugó nemlinearitását jellemzi, q pedig a $-x$ irányba mutató konstans erő. A mozgást leíró stochasztikus differenciálegyenlet az alábbi alakú

$$\dot{x}(t) = -\mu\frac{dU}{dx} + \eta(t) = -\mu\left(ax + bx^3 + q\right) + \eta(t). \tag{2}$$

Itt μ egy kinetikus együttható [példaként lásd a 10-11. heti előadást, vagy az előadásjegyzet (9) egyenletét], $\eta(t)$ pedig a termális fluktuációkból adódó véletlen erő.

A fenti egyenlet számítógépes megoldásához diszkretizálnunk kell időben

$$x(t+\varepsilon) = x(t) - \mu\left[ax(t) + bx^3(t) + q\right]\varepsilon + \eta_\varepsilon(t) \quad , \tag{3}$$

ahol x növekményének determinisztikus része $-\mu\left[ax(t) + bx^3(t) + q\right]\varepsilon$ adott, a stochasztikus részt, $\eta_\varepsilon(t)$-t, pedig minden egyes időpillanatban függetlenül választjuk (az előadásjegyzetben leírtak szerint) egy Gauss eloszlásból

$$P_G(\eta_\varepsilon) = \frac{1}{\sqrt{4\pi D\varepsilon}}e^{-\eta_\varepsilon^2(t)/4D\varepsilon} \quad . \tag{4}$$

Fontos megjegyezni, hogy a fenti eloszlás függ a diszkretizációtól (ε), s a zaj amplitúdója D és a kinetikus együttható μ nem függetlenek, hányadosuk a hőmérséklettel arányos

$$\frac{D}{\mu} = k_BT\,. \tag{5}$$

Az alábbiakban a rendszer viselkedését a következő két hőmérsékleten kell vizsgálni: ($k_BT_1 = 1$, $D = \mu = 1$) és ($k_BT_2 = 3$, $D = 3$, $\mu = 1$).

Feladatok:

(1) Iteráljuk a (3) egyenletet az a, b, q paraméterek alább megadott értékeinél. Készítsünk hisztogramot a mért x értékekből. Mutassuk meg, hogy elég kis ε-ra az eredmény nem függ az ε értékétől, s a kapott eloszlás az egyensúlyi eloszlás

$$P^{(e)}(x) = \frac{1}{Z}e^{-U(x)/k_BT} \quad . \tag{6}$$

(2) Mérjük meg a stacionárius $\langle x\rangle$, $\langle x^2\rangle$ és $\langle x^4\rangle$ átlagokat, s vizsgáljuk meg, hogy összhangban van-e az $\langle x^2\rangle$-re kapott eredmény az ekvipartíció tételével!

(a, b, q) paraméterek egyénekre szabott értékei:

(1,0,1) – Fodor, Dajka, Klement, (1,0,-1) – Godó, Méhes, (0,1,1) – Fejes, Szénási,

(1,1,-1) – Papp K., Misur, (-2,1,0) – Sándor, Míg, (-1,1,1) – Albert, Papp J., Borkovits

(-2,1,2) – Bakó, Bódy

Márkusz, Vass:

(i) A fenti probléma (-1,2,-2) esetre.

(ii) Legyen két líneáris oszcillátor különböző T_1, T_2 hőmérskleteken. Legyen a két oszcillátor csatolva (pl. a kitéréskülönbség négyzete legyen a kölcsönhatás potenciálja). Végezzünk szimulációkat erre a rendszerre, határozzuk meg a stacionárius eloszlást, valamint a két oszcillátor között folyó átlagos energiaáramot!